TITLE:
一般化された伏見関数と量子多体状態の"複雑さ"(「有限量子多体系の励起構造と相関効果」-原子核・量子ドット・ボース凝縮・クラスターを中心として-,研究会報告)

AUTHOR(S):
杉田, 歩

CITATION:
杉田, 歩. 一般化された伏見関数と量子多体状態の"複雑さ"(「有限量子多体系の励起構造と相関効果」-原子核・量子ドット・ボース凝縮・クラスターを中心として-,研究会報告). 物性研究 2002, 78(3): 275-276

ISSUE DATE:
2002-06-20

URL:
http://hdl.handle.net/2433/97233

RIGHT:

京都大学学術情報リポジトリ
KURENAI 紅
Kyoto University Research Information Repository

一般化された伏見関数と量子多体状態の”複雑さ”

杉田 歩 (阪大RCNP)

この講演では、量子多状態の”複雑さ”を定量的に測る指標を定義する試みについて述べた。ここで”単純””複雑”という時には、直感的には以下のような対比をイメージしている。

単純	$\Longleftrightarrow$	複雑
レギュラー (可積分)		カオス
独立粒子的、平均場的		強い相関 (エンタングルド)

まず、上の表1段目の、レギュラーとカオスの対比について、一体問題の場合で考えてみよう。(多体問題はその後議論する。) 古典系における可積分系からカオスへの変化は、対称性からくる不変多様体が壊れ、軌道が非局在化していくプロセスとして捉えられる。量子力学系においても、相空間上の分布関数である伏見関数[1]に同様の現象が現れると期待することは自然であろう。ある量子状態 $|\varphi\rangle$ の伏見関数は、コヒーレント状態 $|z\rangle$ を使って、

$$\mathcal{H}_{|\varphi\rangle}(p,q) = |\langle z|\varphi\rangle|^2 \tag{1}$$

と定義される。複素数 z は、$z = (q+ip)/\sqrt{2}$ の関係で相空間上の変数 (p,q) と結ばれている。

分布関数の広がりを表わす量としては、エントロピーとモーメントが代表的である。我々は論文 [1] において、2次のモーメントの逆数

$$W(\mathcal{H}_{|\varphi\rangle}) = \{M^{(2)}(\mathcal{H}_{|\varphi\rangle})\}^{-1} = \frac{1}{\int dp\,dq\{\mathcal{H}_{|\varphi\rangle}\}^2} \tag{2}$$

をカオス性の指標にとることを提案した。この量は、伏見関数が占めているおおよその体積を表わす。また、モーメントがエントロピーと異なり、代数的な量であることから、例えば調和振動子のベースで展開した場合、展開係数から直接 (数値積分なしに) 求めることが可能で、かなり計算が楽である。実際に2次元の非調和振動子に適用した例が論文 [1] にあり、系がカオス的になるに従って、エネルギー固有状態の伏見関数が広がっていく様子がわかる。

次に、この量を多体問題に拡張することを考えよう。伏見関数の定義 (1) を見ればわかるように、コヒーレント状態が定義できれば伏見関数も定義できる。多体問題に対してコヒーレント状態を定義するやり方はいくつか考えられるが、ここでは、系の一体状態を変換する群を考え、それに対するコヒーレント状態を作る。

例としてフェルミオン系を考える。取りうる一粒子状態が N 個あり、その中に m 個の粒子が入っているとしよう。一体状態の変換は、particle-hole (p-h) 演算子 $X_i^j = a_j^\dagger a_i$ によって為され、それらの全体は $U(N)$ 群のリー代数を成す。コヒーレント状態は、”真空” $|-\rangle = |0,0,\ldots,1,1,\ldots,1\rangle$ に指数関数の形で p-h 演算子を掛けていくことで生成できる:

$$|\zeta\rangle = \mathcal{N}\exp(\zeta_j^i X_i^j)|-\rangle. \tag{3}$$

ここで、$\mathcal{N}$ は規格化定数である。この状態は、実は再びスレーター行列式になっており、また、この形でほとんど全ての[2]スレーター行列式を尽くすことができる。これは Thouless の定理と呼ばれているが、p-h 演算子の意味を考えれば当然で、要するに、”真空”状態のスレーター行列式に含まれていた一粒子状態を、p-h 演算子で別の一粒子状態に入れ替えているわけである。まとめると、

$$\text{コヒーレント状態} \Longleftrightarrow \text{スレーター行列式 (独立粒子状態)} \tag{4}$$

[1]量子状態の相空間上の表現としては、他に Wigner 関数がよく知られているが、正定値でないのでここでの目的には適さない。

[2]正確に言うと、真空状態と直交しない全ての状態。少し定義をとりなおすことによって、真空状態と直交するような状態も表わせるので、あまり気にしなくて良い。

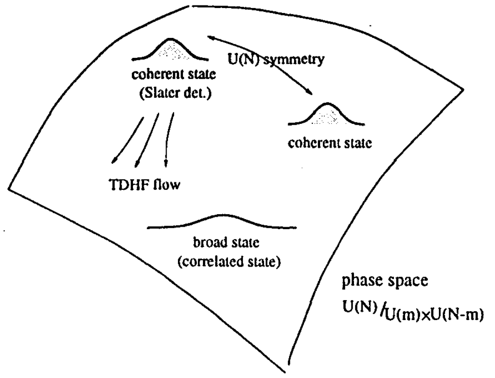

図 1: フェルミオン系の伏見関数の概念図。相空間 $U(N)/(U(m) \times U(N-m))$ の上に伏見関数が定義され、最も局在化した波束がスレーター行列式に対応する。この相空間上には、TDHF 方程式による流れが定まっており、この流れのカオス性と、伏見関数の広がりは、密接に関連しているだろうと予想できる。

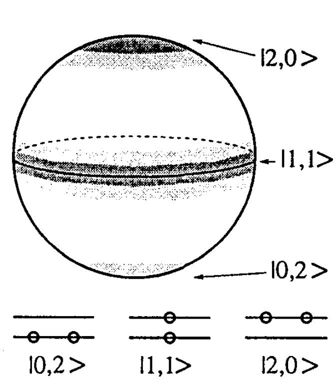

図 2: 簡単なボソン系の伏見関数。$|2,0\rangle$ と $|0,2\rangle$ は 2 体相関の無い状態で、それに対応して北極と南極に局在した波束状態になっているが、相関のある $|1,1\rangle$ は赤道付近にやや広がった形で存在している。

また、コヒーレント状態はもっとも局在化した状態でもあるので、伏見関数の 2 次モーメントを測ると最大になるはずである。つまり、

$$M^{(2)}(\mathcal{H}_{|\varphi\rangle}) \text{ が最大} \Longleftrightarrow |\varphi\rangle \text{ がコヒーレント状態} \tag{5}$$

従って、

$$M^{(2)}(\mathcal{H}_{|\varphi\rangle}) \text{ が最大} \Longleftrightarrow |\varphi\rangle \text{ が独立粒子状態} \tag{6}$$

このように、一体問題の時に導入したカオス性の指標を形式的に多問題に拡張すると、最初の表の 2 段目、多体相関の指標としての意味を自然に持つようになる。また、ここで導入したコヒーレント状態に対してある種の古典力学が定義でき、それはいわゆる Time Dependent Hartree-Fock（TDHF）方程式とちょうど一致する。(図 1 参照)

フェルミ粒子系以外への拡張も簡単である。例えば、量子情報で重要な qubit 系等のスピン系では、コヒーレント状態に相当するのは、一体状態の積の形に書かれたエンタングルメントのない状態であり、ボソン系なら、ボーズ凝縮したような、全ての粒子が同じ一体状態に落ちたような状態がコヒーレント状態になる。

図 2 に、最も簡単と思われる例を示した。一粒子状態が 2 つあり、そこにボソンを 2 つ詰める。一体状態の変換群は $U(2)$、相空間に相当する空間は球面となる。多体状態は 3 次元で、$|2,0\rangle, |1,1\rangle, |0,2\rangle$ で張られる（スピン 1 表現)。これらの中で、$|1,1\rangle \sim |1,0\rangle|0,1\rangle + |0,1\rangle|1,0\rangle$ だけが単一の積で書けず、相関を持つ状態である。その違いが、伏見関数の広がりの違いとして現れている。2 次モーメントの具体的な計算については、論文 [2] を見てください。

参考文献

[1] A. Sugita and H. Aiba, nlin.CD/0106012, to appear in Phys. Rev. E.

[2] A. Sugita, nlin.CD/0112042.